

# Fundamentos del modelado de flujo de CO<sub>2</sub> en el subsuelo

GCCC Digital Publication Series #13-23

Vanessa Nunez-Lopez



**Keywords:**

Modeling-Flow simulation; Capacity; Overview

**Cited as:**

Nunez-Lopez, V., 2013, Fundamentos del modelado de flujo de CO<sub>2</sub> en el subsuelo: presented for the Global CCS Institute, 02 October 2013. GCCC Digital Publication Series #13-23.



# Fundamentos del Modelado de Flujo de CO<sub>2</sub> en el Subsuelo

Webinar – 02 October 2013, 2300 AEST

<http://www.globalccsinstitute.com/get-involved/webinars/2013/10/02/fundamentals-modelling-co2-movement-underground>

WEBINAR  
PRESENTED BY



GLOBAL  
CCS  
INSTITUTE

STORE

---

# Fundamentos del Modelado de Flujo de CO<sub>2</sub> en el Subsuelo

Vanessa Núñez López, M.S., M.A.  
vanessa.nunez@beg.utexas.edu

# Objetivos generales del modelado dinámico

---

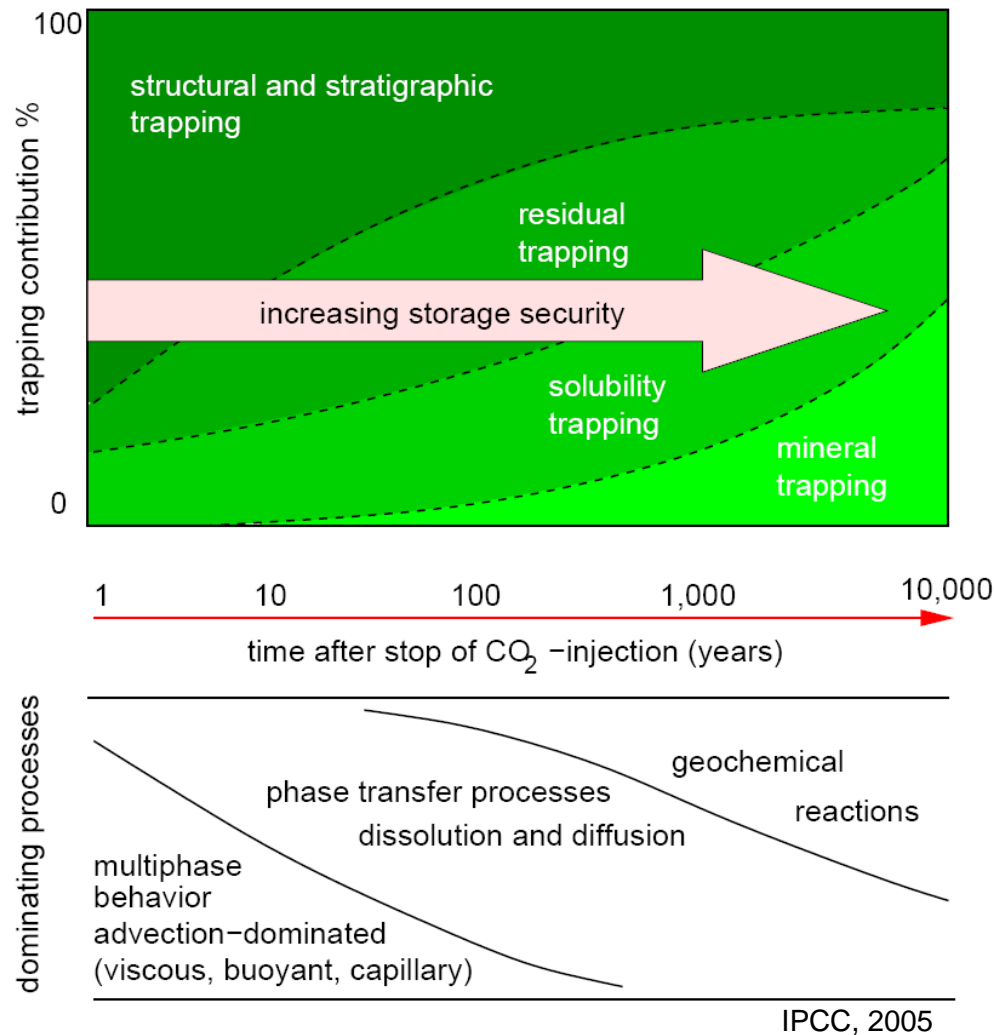
- Estimación de capacidad
  - Cuanto CO<sub>2</sub> podemos almacenar?
  - Hacia donde fluirá el CO<sub>2</sub> (distribución del CO<sub>2</sub>)?
  - Como se distribuirá el CO<sub>2</sub> entre las fases? (libre, disuelto, mineralizado)
  - Como evolucionará la distribución del CO<sub>2</sub> con el tiempo?
- Inyectividad de la formación
  - Que tan rápido se puede inyectar el CO<sub>2</sub>?
  - En donde y cómo (ubicación y tipo de pozos)?
- Integridad del almacenamiento
  - Fugas verticales (a través de pozos y fallas)
  - Fugas laterales (mas allá de los esquemas de inyección)

# Consideraciones generales del modelado de la inyección de CO<sub>2</sub> en acuíferos salinos

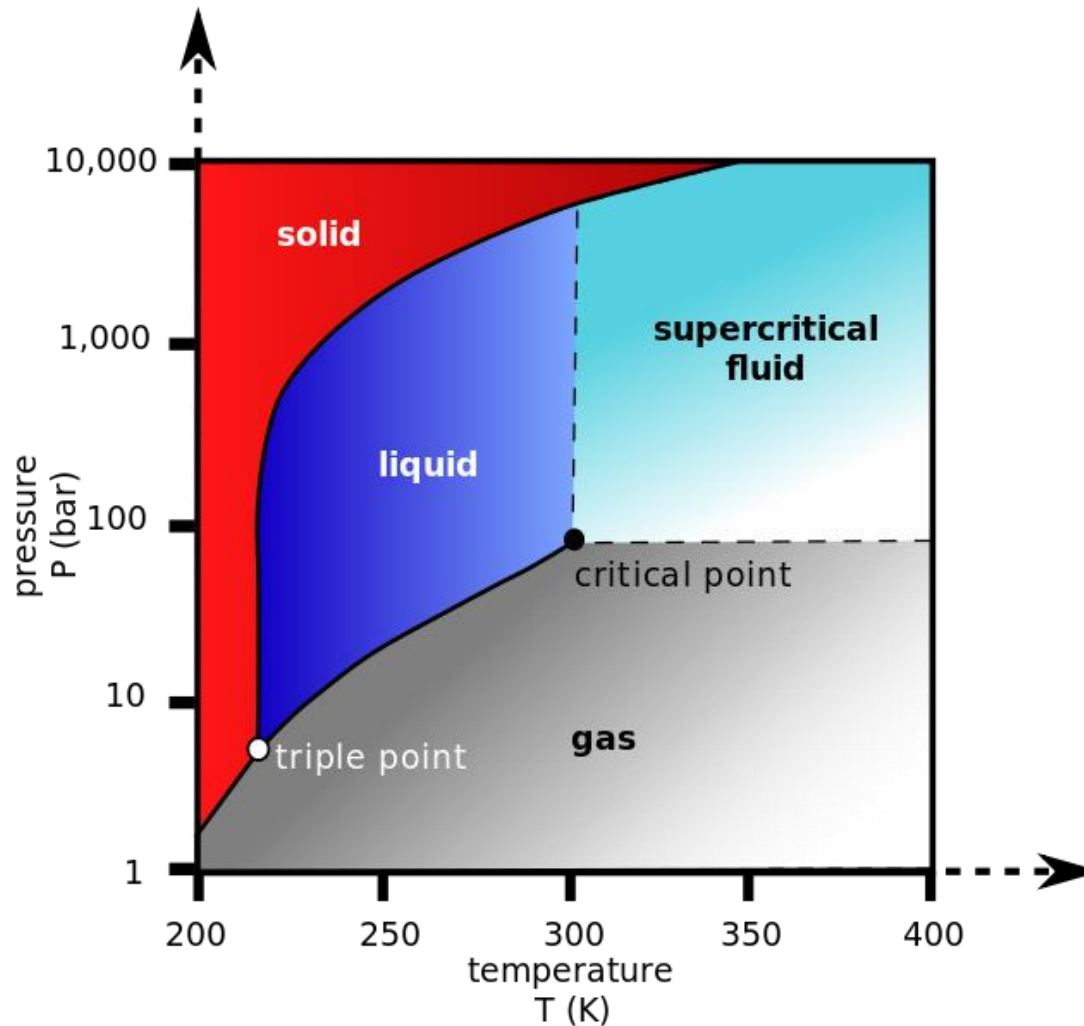
---

- Flujo de dos fases (mas simple)
- Permeabilidad relativa y presión capilar (histeresis)
- Convección de flotabilidad (inestabilidad de gravedad viscosidad)
- Distribución de fases
- Efectos térmicos
- Interacciones geoquímicas
- Respuestas geomecánicas

# Procesos geofísicos: dependencia del tiempo



# Diagrama de fases del CO<sub>2</sub>



The properties under standard condition at 1.013 bar and 0 °C are:

- Mol. weight: 44.010 g/mol
- Sp. gravity to air: 1.529
- Density: 1.95 kg/m<sup>3</sup>

Critical properties:

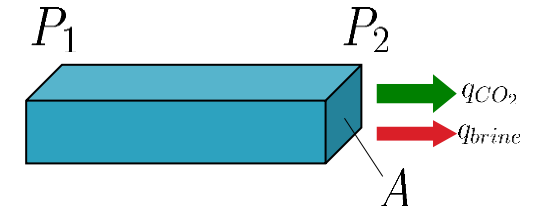
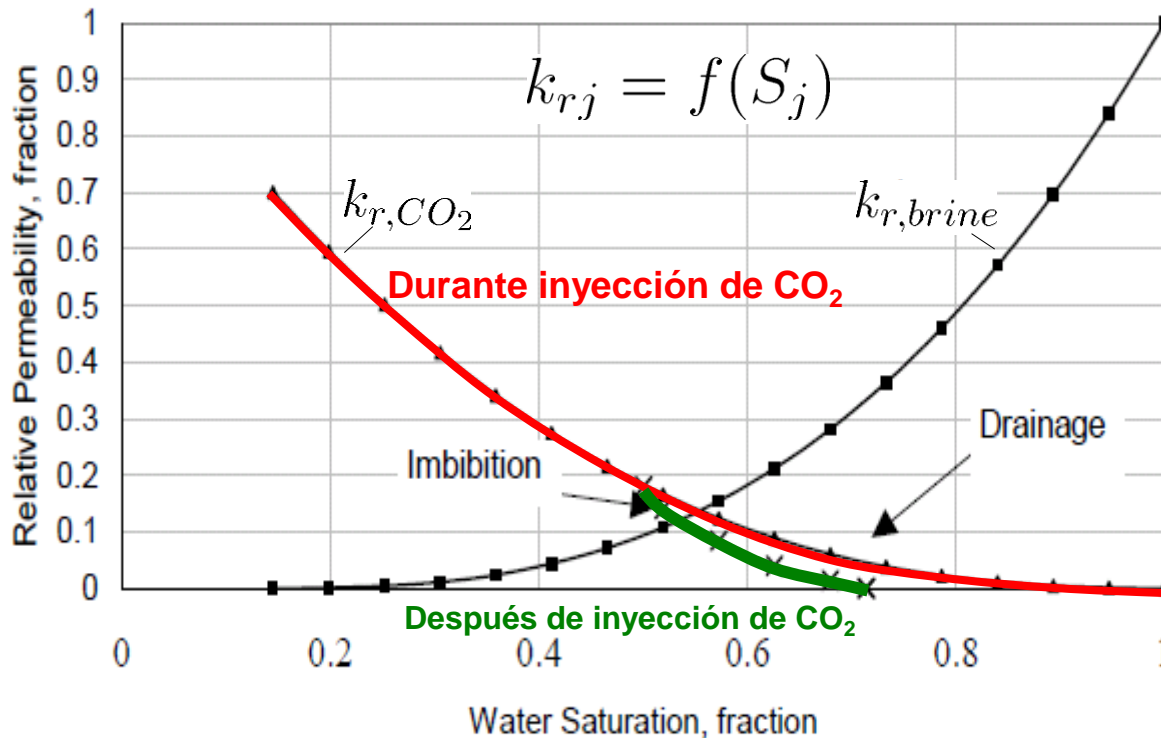
- T<sub>c</sub>: 31,05 °C
- P<sub>c</sub>: 73.9 bar
- V<sub>c</sub>: 94 cm<sup>3</sup>/mol

Triple point:

- T<sub>tr</sub>: - 56,6 °C
- P<sub>tr</sub>: 5.10 bar

# Flujo multifásico: permeabilidad relativa

El fenómeno de histéresis es relevante en el entrapamiento por fase residual



$$\frac{q_j}{A} = -\frac{k_{rj}k}{\mu_j} \nabla P_j$$

$j = CO_2 \text{ or brine}$

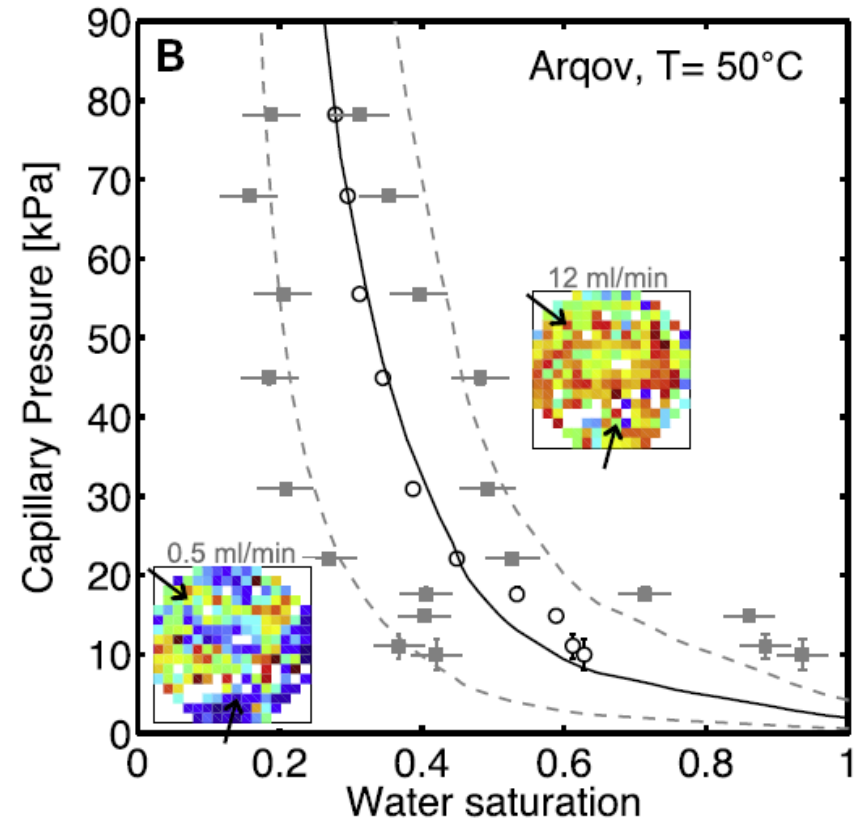
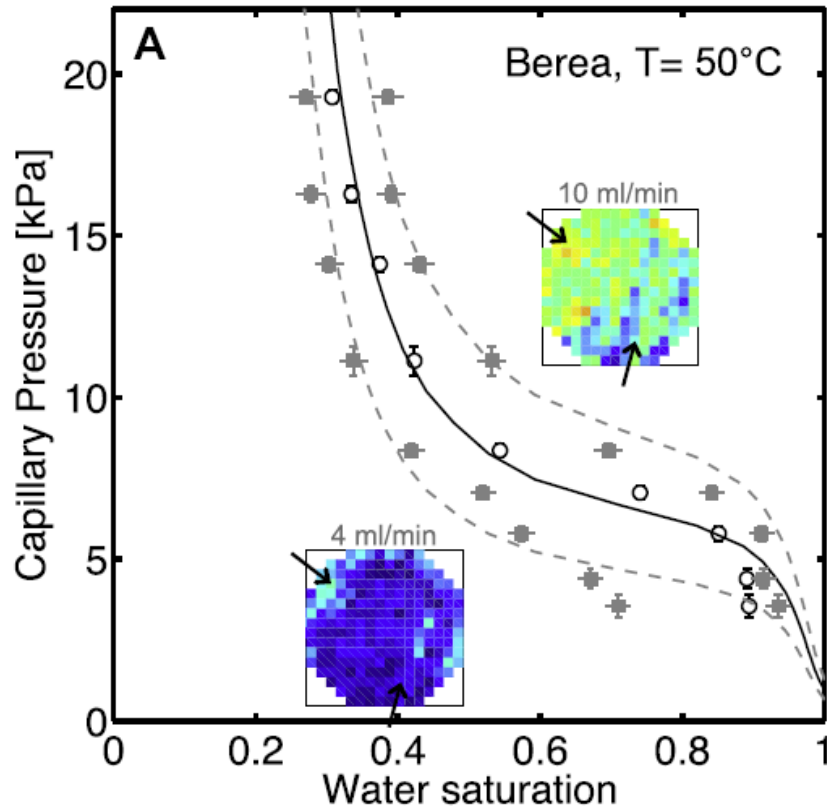
$$k_{rj} = f(S_j)$$

**Drenaje:** CO<sub>2</sub> desplaza agua

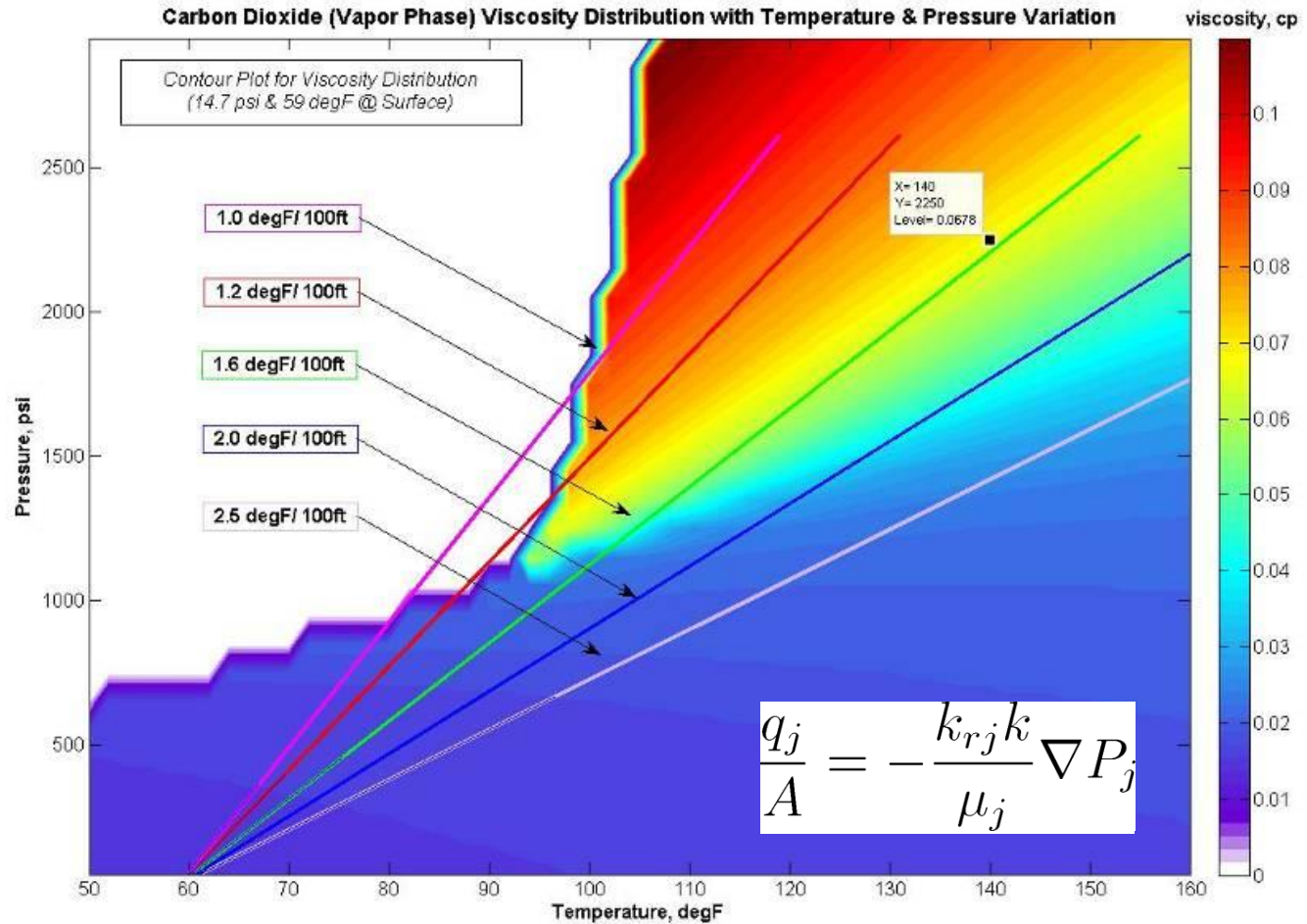
**Imbibición:** agua desplaza CO<sub>2</sub>



# Flujo multifásico: presión capilar

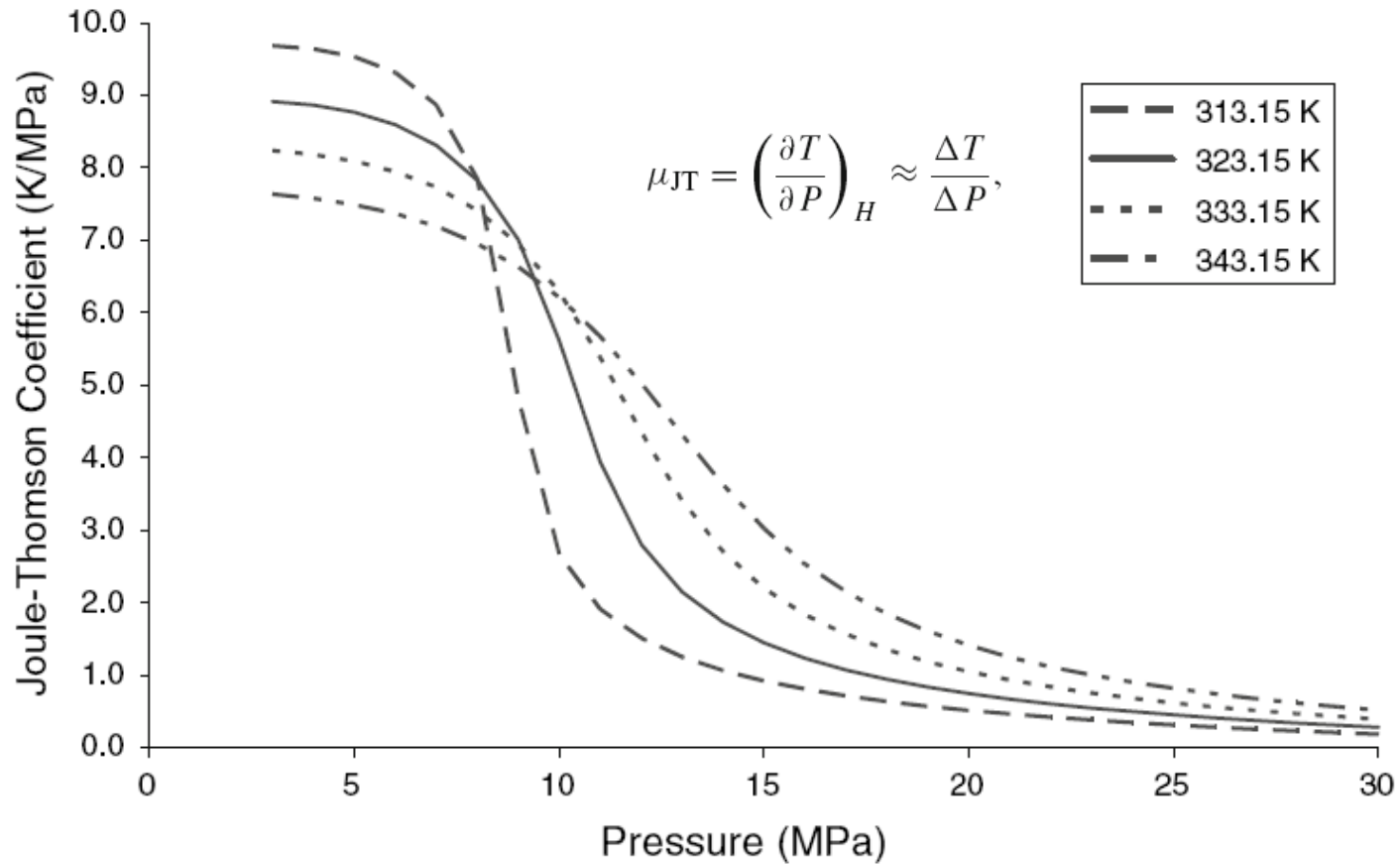


# Propiedades de fluidos: Viscosity



# Efectos no isotérmicos

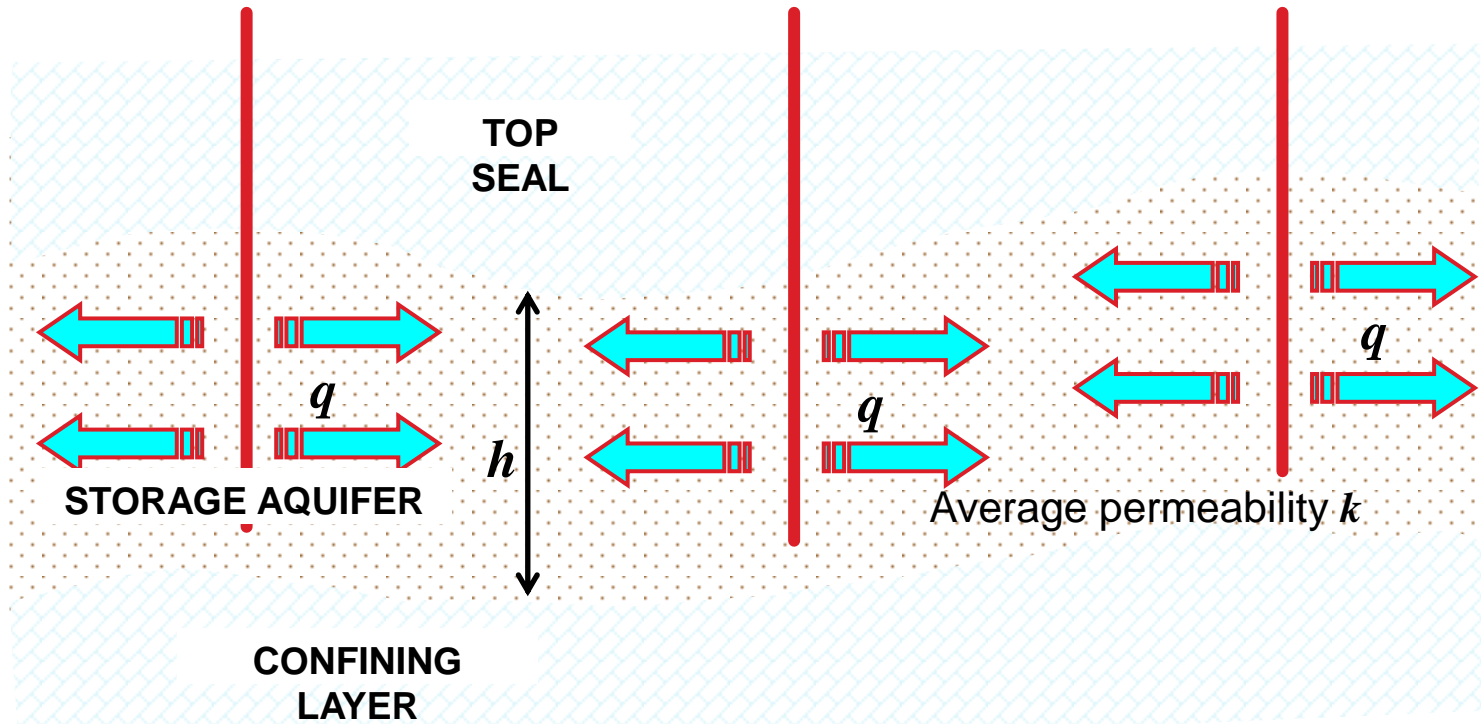
## Efecto Joule-Thomson



NIST Webbook

# Modelo Analítico: Inyectividad

La tasa de inyección de CO<sub>2</sub> depende de la inyectividad de la formación



Inyectividad en flujo monofásico  $\frac{q}{P_{bh} - \bar{P}} \sim kh$

Inyectividad para almacenar CO<sub>2</sub> *Complicado!*

# Modelo Analítico: Inyectividad

El índice de inyectividad depende del  $kh$  de la formación y de las propiedades del  $\text{CO}_2$

$$II \equiv \frac{q}{(P_{bh} - \bar{P})} = 2\pi \frac{kh}{\mu \left( \ln \frac{r_e}{r_w} - \frac{3}{4} + S \right)}$$

Flujo radial  
Steady-state  
Flujo monofásico

$$P_{bh} - P(r) = \frac{q\mu}{2\pi kh} \left( \ln \left( \frac{r}{r_w} \right) + S \right)$$

Donde,

$II$  = índice de inyectividad (fluido monofásico)

$q$  = tasa de inyección de  $\text{CO}_2$  @ condiciones de yacimiento

$S$  = factor de daño ( $-4 < S < 10$ )

$r_e$  = radio del acuífero

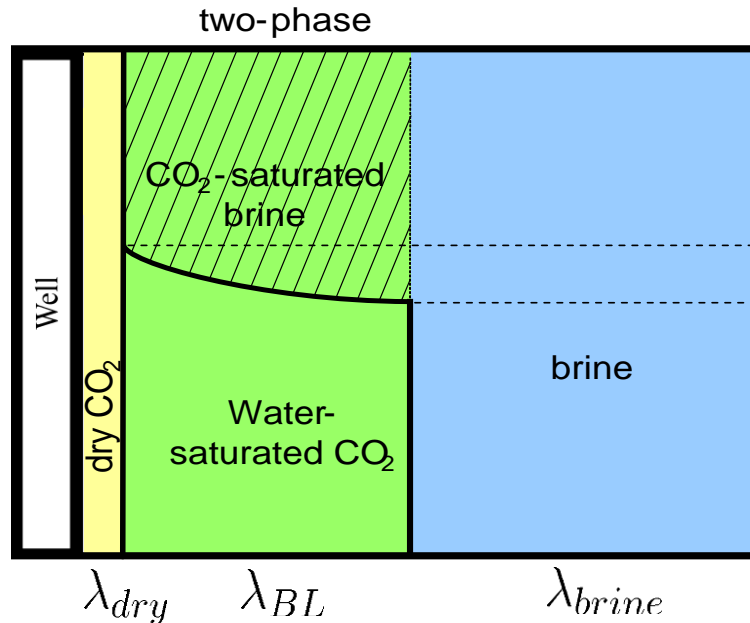
$r_w$  = radio del pozo

$\mu$  = viscosidad del agua del acuífero

$P_{bh}$  = presión de fondo

# Modelo Analítico: Inyectividad

Ajustar el índice de inyectividad para incluir efectos de flujo multifásico  
(CO<sub>2</sub> desplazando agua)



Estimado aproximado

$$\lambda_{eff} \approx \frac{\lambda_{brine}}{2} = \frac{1}{2\mu_{brine}}$$

Índice de inyectividad (para dos fases)

$$I I_{eff} \equiv \frac{q}{P_{bh} - \bar{P}} = 2\pi \frac{kh\lambda_{eff}}{\ln \frac{r_e}{r_w} - \frac{3}{4} + S}$$

$$\frac{1}{\lambda_{eff}} \sim \frac{1}{\lambda_{dry}} + \frac{1}{\lambda_{BL}} + \frac{1}{\lambda_{brine}}$$



# Modelo Analítico: Inyectividad

Como utilizar la ecuación de inyectividad?

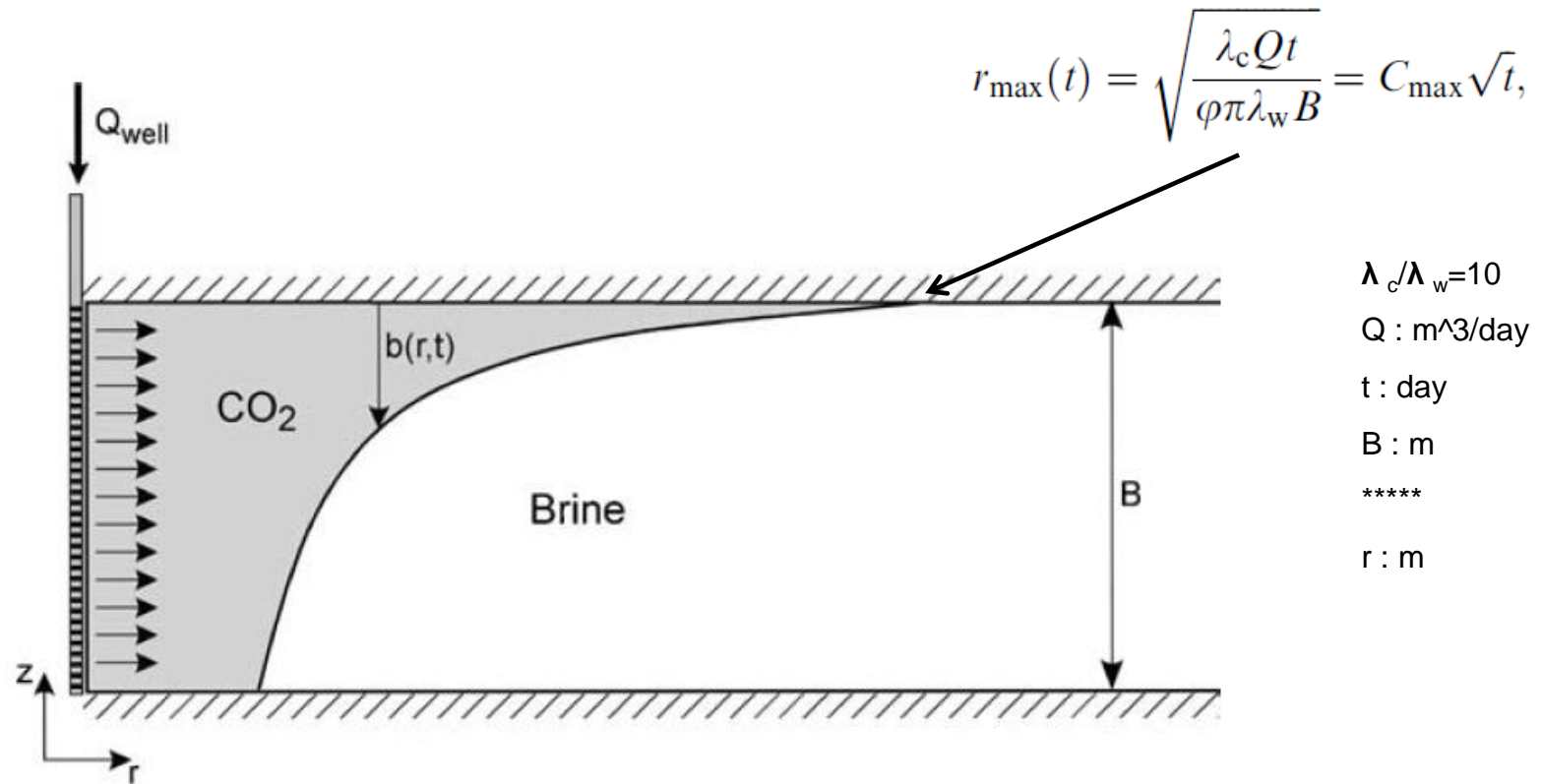
$$II_{eff} \equiv \frac{q}{P_{bh} - \bar{P}} = 2\pi \frac{kh\lambda_{eff}}{\ln \frac{r_e}{r_w} - \frac{3}{4} + S}$$

- Lo que necesitamos:
  - $q, k, h, r_e, r_w, S, \mu, P$
- Lo que podemos estimar:
  - Presión de fondo (debe ser menor a la presión de fractura)

$$P_{bh} < P_{frac} \approx 0.7 \frac{\text{psi}}{\text{ft}} \times z = 16 \frac{\text{MPa}}{\text{km}} \times z$$

- Si la presión promedio de la formación aumenta durante la inyección, la tasa de inyección disminuye durante el almacenamiento.
- La inyección de CO<sub>2</sub> frío puede reducir la presión de fractura.

# Forma y extensión areal de la pluma de CO<sub>2</sub>

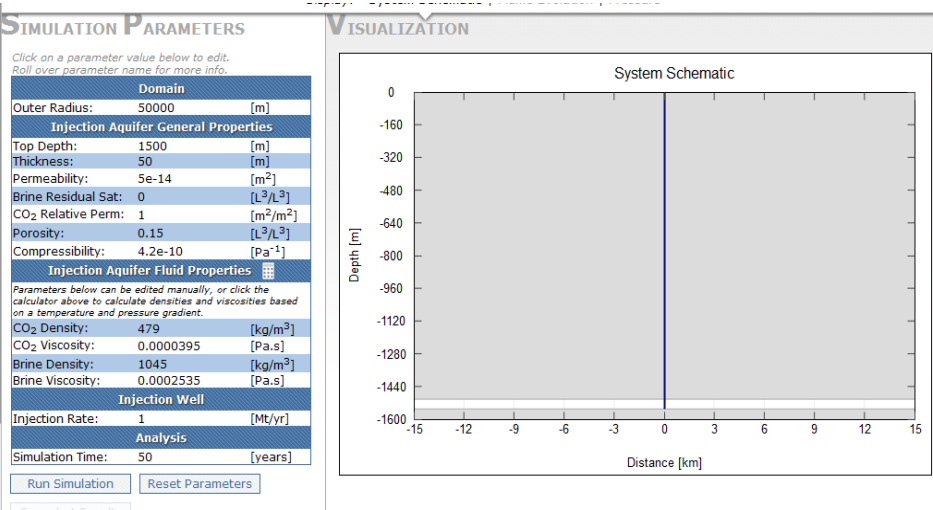


Nordbotten et al., 2005



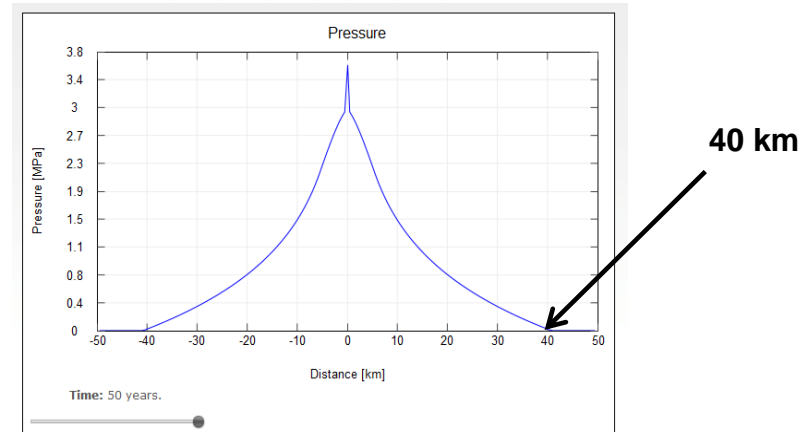
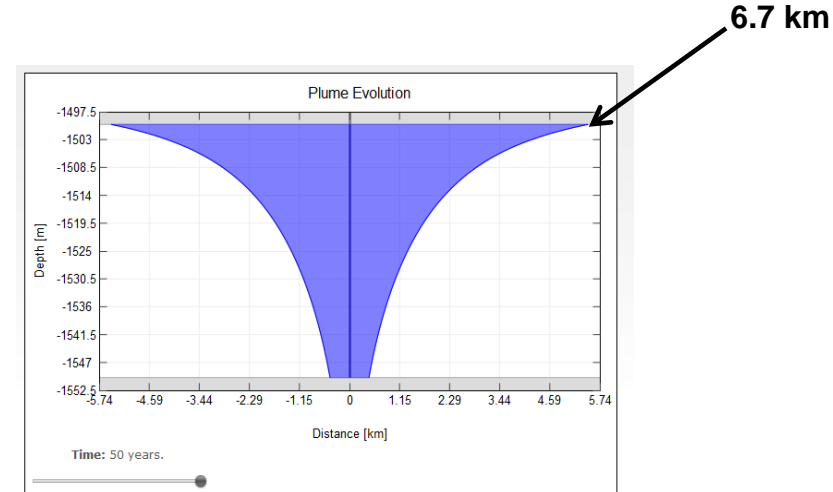
# Forma y extensión areal de la pluma de CO<sub>2</sub>

## Useful online tool



Pressure is a diffusive property and travels faster in the formation

<http://monty.princeton.edu/CO2interface/>



# Modelado numérico

---

- Las mismas herramientas utilizadas por la industria petrolera se pueden utilizar para modelar la inyección de CO<sub>2</sub> en acuíferos salinos.
- Se requiere un *grid* apropiado del yacimiento, tanto en la dirección radial como en la vertical, de fina resolución en las cercanías del pozo y hacia el tope de la unidad de flujo.
- El flujo vertical pudiera sobre-estimarse si el *aspect ratio* del *grid* es alto.
- Tanto modelos de petróleo negro como modelos composicionales pueden ser utilizados para la inclusión de disolución mutua de agua y CO<sub>2</sub>.
- La transferencia de masa con el agua de yacimiento no está tradicionalmente incluida en las herramientas de simulación.
- Nuevos modelos PVT han sido desarrollados para simulaciones composicionales.

# Modelo de propiedades (PVT)

- Las ecuaciones de estado (EOS) cúbicas no modelan apropiadamente las propiedades composicionales del sistema CO<sub>2</sub>-agua.
- Se han hecho mejoras para permitir el cálculo de la disolución mutua de la fase de agua y la fase gaseosa (CO<sub>2</sub>) sin utilizar EOS cúbicas.
- La solubilidad si se obtiene aplicando el equilibrio termodinámico para el cual la fugacidad del CO<sub>2</sub> en la fase gaseosa se evalúa basándose en una EOS cúbica (ejemplo Peng and Robinson, 1976).
- La fugacidad del CO<sub>2</sub> en la fase acuosa se calcula basándose en la ley de Henry:
$$f_{\text{CO}_2} = x_{\text{CO}_2} \cdot H_{\text{CO}_2}$$
donde  $x_{\text{CO}_2}$  = fracción molar del CO<sub>2</sub> en la fase acuosa  
 $H_{\text{CO}_2}$  = constante de CO<sub>2</sub> de Henry
- El equilibrio termodinámico se aplica al modelo de vaporización de agua en la fase gaseosa para el cual la fugacidad del agua en la fase gaseosa se calcula con una EOS cúbica (GEM, 2012).

# Modelado numérico: códigos comúnmente utilizados

	CODES	APPLICATIONS
Fluid Dynamics	GEM, ECLIPSE compositional (E300), TOUGH2, ECO2	Multiphase flow, reservoir system dynamics, plume evolution, storage capacity, CO <sub>2</sub> leakage
Geochemistry	TOUGHREACT, UTCHEM, PHREEQC, Retraso	Fluid-rock interactions, mineral trapping, seal integrity, natural CO <sub>2</sub> analogs
Geomechanics	TOUGH-FLAC, CodeBright	Stress-strain and leakage analysis through seals and faults

# Modelado numérico: ejemplo práctico

---

Kumar, a., et al, 2004, “Reservoir simulation of CO<sub>2</sub> storage in deep saline aquifers”, The university of Texas at Austin, SPE 89343

Evaluar:

- 1) El entrampamiento poral de la fase gaseosa rica en CO<sub>2</sub>-rich dentro de la formación
- 2) La disolución en el agua del acuífero; y
- 3) La precipitación del CO<sub>2</sub> disuelto como un mineral, i.e. calcita

Parámetros petrofísicos principales:

- 1) Permeabilidad relativa (incluyendo histeresis)
- 2) Saturación residual de la fase no-mojante

El código del Computer Modeling Group (CMG-GEM) fue utilizado

# Modelado numérico: ejemplo práctico

## Simulation Input

### Aquifer Properties

Length, ft	53000
Width, ft	53000
Thickness, ft	1000
Depth at top of formation at injection well, ft	5300
Temperature, °F	140
Initial pressure, psia	2265
Dip, degree	1
Salinity, ppm	100000
Dykstra-Parsons coefficient	0.7
Horizontal to vertical permeability ratio	0.001
Mean permeability, md	100
Horizontal permeabilities of each layer*, md	
Layers 1-4	89
Layers 5-8	65
Layers 9-12	46
Layers 13-16	30
Layers 17-20	15
Layers 21-24	120
Layers 25-28	165
Layers 29-32	235
Layers 33-36	840
Layers 37-40	370
Porosity	0.25
Residual water saturation	0.25
Residual gas saturation	0.25
Gas end point relative permeability	1.0
Water end point relative permeability	0.334
Grid	40×40×40
Maximum injection pressure, psia	3300
Maximum injection rate, MMSCF/D	50

### Description of Components

Component	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
Critical pressure, psi	1070.0	3200.11
Critical temperature, °F	87.77	705.1
Critical volume, cu ft/lb-mole	1.5076	0.8962
Molecular weight, lb/lb-mole	44.01	18.015
Acentric factor, dimensionless	0.22394	0.344
Parachor, dimensionless	78	52

Mineral	Log <sub>10</sub> K <sub>sp</sub>	Log <sub>10</sub> k <sub>β</sub> , mol/m <sup>2</sup> -s	$\hat{A}_\beta$ , m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>	E <sub>aβ</sub> , J/mol
Calcite	1.36	-8.8	88	41870
Anorthite	-8	-12	88	67830
Kaolinite	5.47	-13	17600	62760
Siderite	10.7	-9.35	88	41870
Glauconite	-8.6	-14	4400	58620

Aqueous Species	Concentration, mol/kg H <sub>2</sub> O
H <sup>+</sup>	1.0E-7
Ca <sup>2+</sup>	9.12E-5
SiO <sub>2</sub> (aq)	2.35E-8
Al <sup>3+</sup>	2.32E-11
Fe <sup>2+</sup>	3.22E-6
Fe <sup>3+</sup>	4.99E-5
Mg <sup>2+</sup>	5.E-7
K <sup>+</sup>	5.E-7
OH <sup>-</sup>	5.46E-7
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	2.49E-2
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1.17E-5

# Modelado numérico: ejemplo práctico

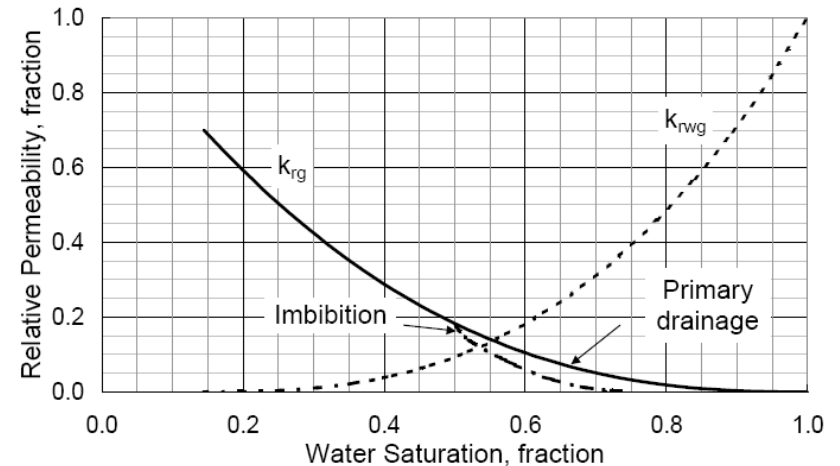
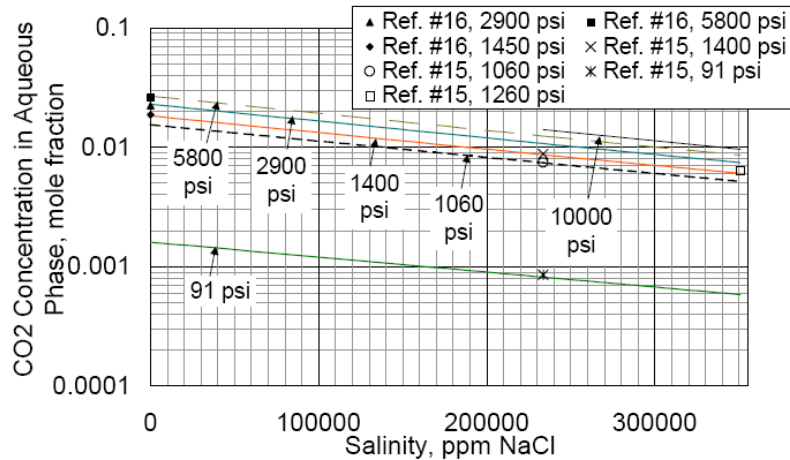
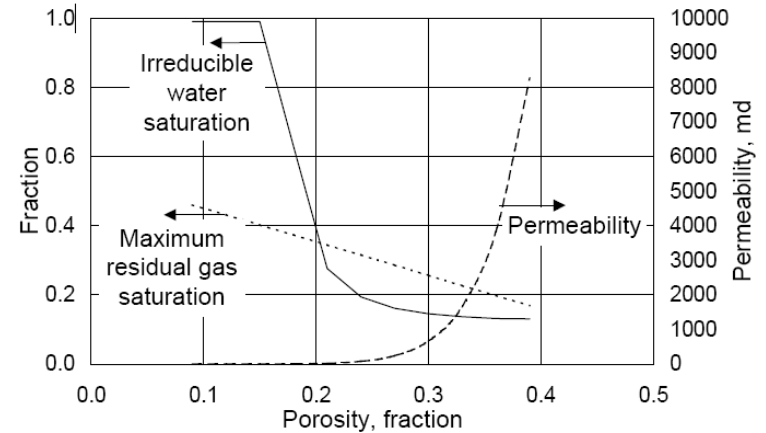
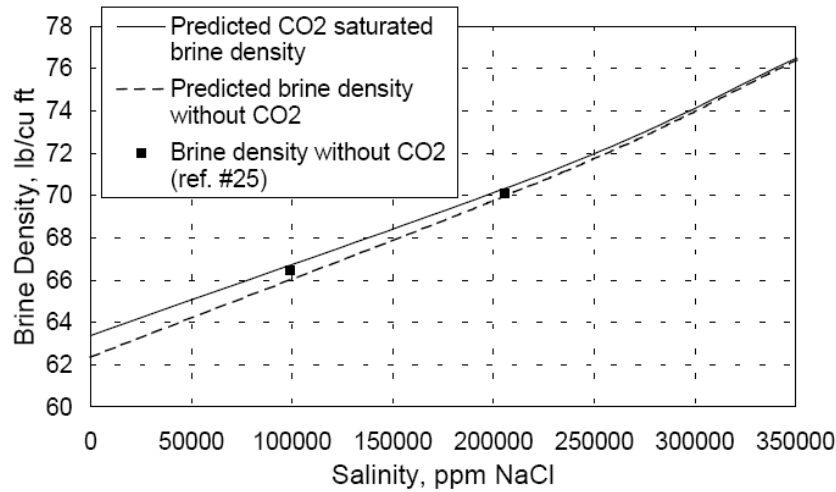
Case 1 - CO <sub>2</sub> injection only	Injection 100 m <sup>3</sup> /day of CO <sub>2</sub> for 10 years and shut-in
Case 2 - simultaneous water injection	Co-injection 100 m <sup>3</sup> /day of CO <sub>2</sub> and 100 m <sup>3</sup> /day of water for 10 years and shut-in
Case 3 - sequential water injection	Sequential injection 100 m <sup>3</sup> /day of CO <sub>2</sub> for 10 years, then 100 m <sup>3</sup> /day of water for another 10 years and shut-in
Case 4	Increase initial anorthite concentration to 10 times more than that of Case 3

Source	Temperature Range, °F	Pressure Range, psia	Salinity Range, ppm total dissolved solids
15	104-319	100-1400	230,000-350,000
16	120-302	1450-5800	0
18-19	40-69	930-4280	0-31,000

Mineral	Molecular Weight	Density, kg/m <sup>3</sup>	Initial Volume Fraction
Calcite	100.1	2710	0.0088
Anorthite	278.2	2740	0.0088
Kaolinite	258.16	2410	0.0176
Siderite	115.86	3960	0.0088
Glauconite	426.93	2670	0.044

Reaction	Equilibrium Constant, log <sub>10</sub> K
H <sub>2</sub> O ↔ H <sup>+</sup> + OH <sup>-</sup>	-13.2631
CO <sub>2</sub> (aq) + H <sub>2</sub> O ↔ H <sup>+</sup> + HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-6.3221
CO <sub>2</sub> (aq) + H <sub>2</sub> O ↔ 2H <sup>+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	-16.5563

# Modelado numérico: ejemplo práctico





# Modelado numérico: ejemplo práctico

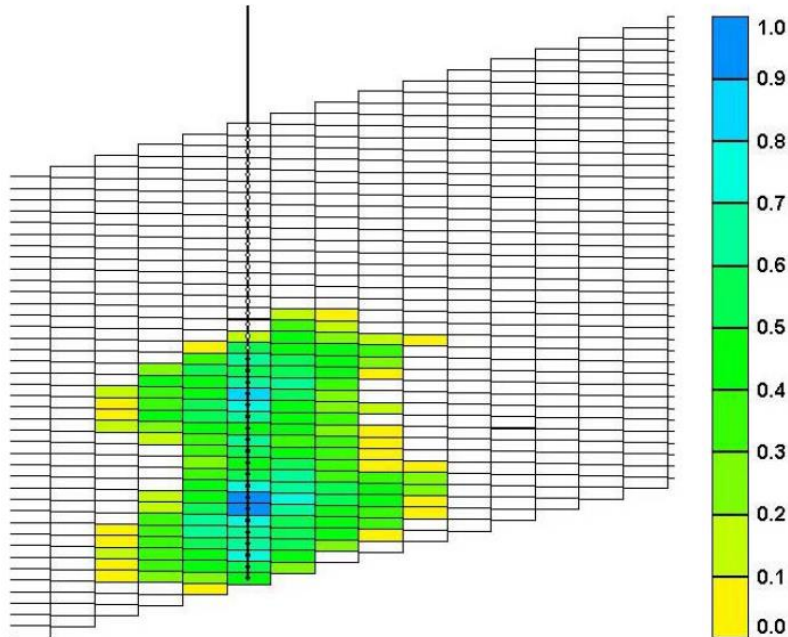


Fig. 7—Gas saturation at 50 years (zoomed-in vertical slice through the injection well in x-z direction)

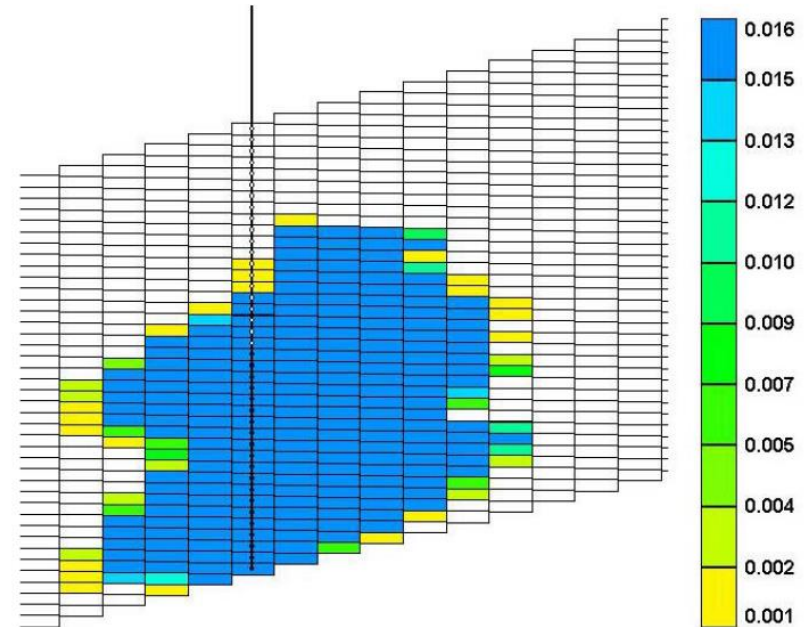


Fig. 9—CO<sub>2</sub> mole fraction in aqueous phase at 1000 years (zoomed-in vertical slice through the injection well in x-z direction)

# Modelado numérico: ejemplo práctico

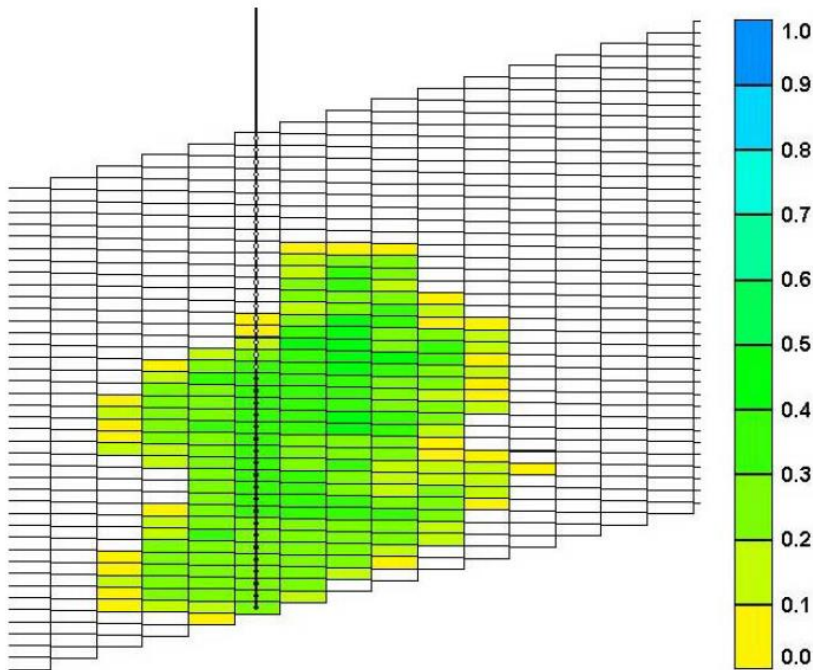


Fig. 8—Gas saturation at 1000 years (zoomed-in vertical slice through the injection well in x-z direction)

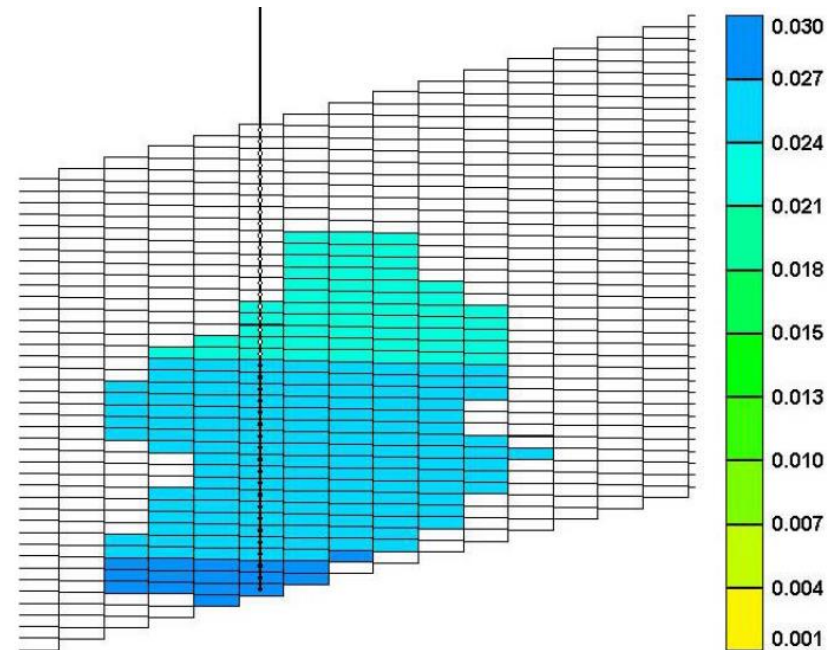


Fig. 10—H<sub>2</sub>O mole fraction in gas phase at 1000 years (zoomed-in vertical slice through the injection well in x-z direction)

# Modelado numérico: ejemplo práctico

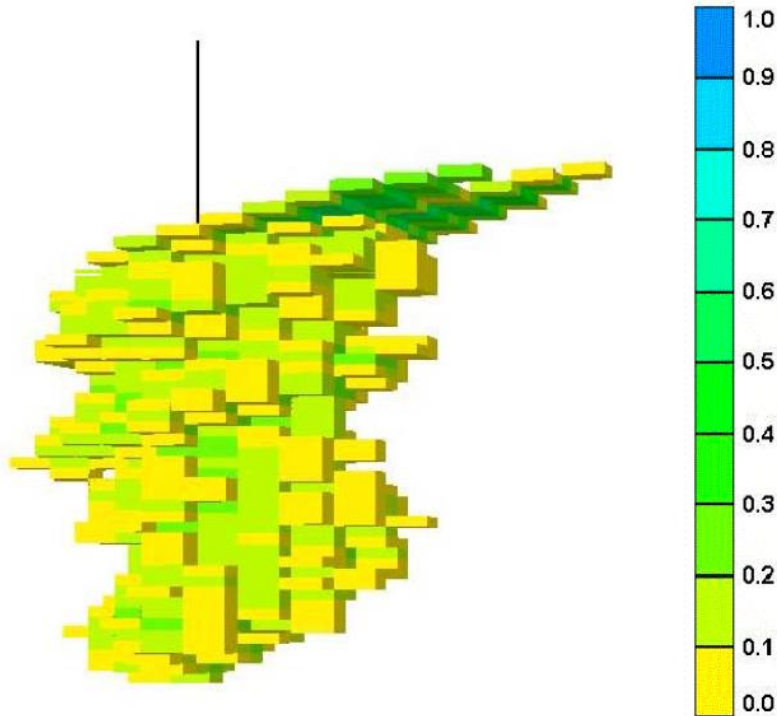


Fig. 12—3-D Gas saturation profile at 1000 years for injection along whole interval

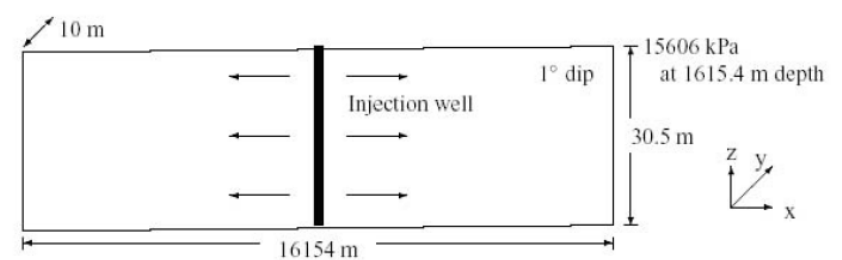


Fig. 13—Schematic of 1D flow field used for simulations that account for mineralization

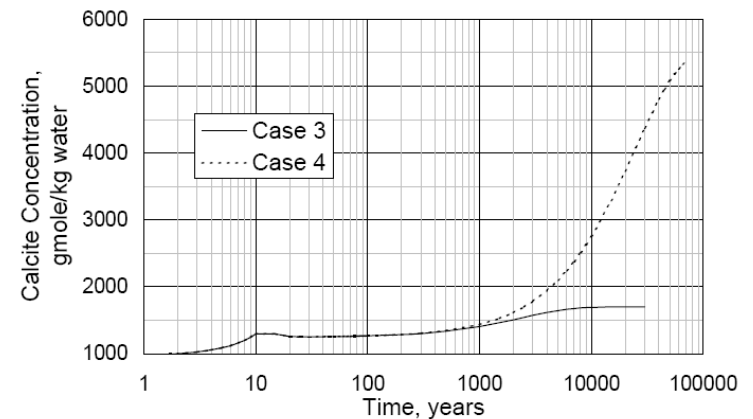


Fig. 16—Comparison of calcite precipitation histories for Case 3 and 4. Case 4 has 10 times more initial anorthite than Case 3

# Lecciones aprendidas

---

- El modelado dinámico previo a la inyección juega un papel importante en la planificación y ejecución de proyectos de almacenamiento de carbono, particularmente en acuíferos salinos en donde los datos son limitados.
- La calidad de los datos de entrada determina la calidad de los resultados. La incertidumbre asociada a los datos geológicos de entrada es con seguridad mucho mayor a la diferencia que pueda existir entre los códigos utilizados en el modelado.
- Estudios de modelado sugieren que el entrampamiento por saturación residual es muy significativo, mas aún que el entrampamiento por disolución o mineralización.
- La simulación de yacimientos es una herramienta excelente para estudios de sensibilidades.